

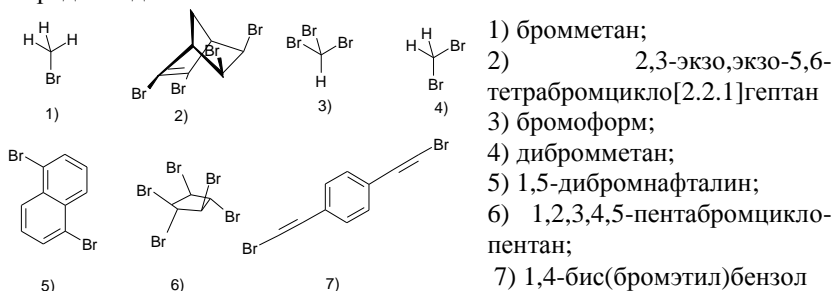
СТРУКТУРООБРАЗУЮЩИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КРИСТАЛЛАХ БРОМСОДЕРЖАЩИХ УГЛЕВОДОРОДОВ

Насибуллина С.Э., Троицкая Е.А., Барташевич Е.В.

Южно-Уральский государственный университет

454080, г. Челябинск, пр. Ленина, д. 76

В настоящее время изучение структурообразующих контактов $\text{Hal} \dots \text{Hal}$, $\text{Hal} \dots \text{H}$ в кристаллах является актуальной задачей, так как позволяет получить ценную информацию о межмолекулярных взаимодействиях, которые в свою очередь определяют структурные, термодинамические, теплофизические и другие свойства вещества. Целью нашего теоретического исследования явилось описание межмолекулярных взаимодействий с участием атома брома $\text{Br} \dots \text{Br}$ в кристаллах галогенуглеводородов с помощью димерного подхода на примере представленного ряда соединений:



В ходе исследования была проведена локализация равновесной геометрии димеров посредством квантово-химических расчетов в приближении B97D/6-311** включающем дисперсионную поправку Гримме с помощью программы Firefly version 8.0.1, на суперкомпьютерном кластере Торнадо (ЮУрГУ).

Общее количество сформированных димеров составило 53. Была произведена оценка изменений геометрии, произошедшей в димерах при переходе из кристаллического окружения в газовую фазу. Оценка производилась с помощью критерия – среднеквадратичного отклонения расстояний, на которое произошло смещение атомов в результате оптимизации геометрии (величина RMSD).

В кристаллах исследуемых бромзамещенных структур наряду с галогенными связями Br...Br (тип II по классификации Г. Дисираджу)

| Соединения | Контакты | RMSD, Å |
|-------------|----------|---------|
| дибромметан | Br...Br | 1,134 |
| | Br...H | 0,219 |
| бромметан | Br...Br | 0,630 |
| | Br...H | 0,375 |

встречаются более слабые ван-дер-ваальсовы взаимодействия Br...Br (тип I). Максимальное отклонение геометрии структуры после оптимизации характерно для

связей Br...Br в дибромметан. Минимальное значение RMSD характерно для 1,5-дибромнафталин.

В результате статистического анализа было выявлено, что в изолированных димерах геометрия контактов Br...Br подверглась большим изменениям, чем геометрия контактов Br...H. Преимуществ в стабилизации взаимодействий за счет контактов типа II не было выявлено.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования РФ 2014г.

СИНТЕЗ МОНО- И БИЦИКЛИЧЕСКИХ 1,2,4-ТРИАЗИНОВ

Науменкова П.О., Книсс И.В., Гавлик К.Д., Бельская Н.П.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

1,2,4-Триазины и их производные проявляют широкий спектр биологической активности, включая противогрибковую, анти-ВИЧ, противораковую, противовоспалительную, анальгетическую и антигипертензивную активность [1]. Поэтому одним из перспективных направлений развития гетероциклической химии является разработка удобных методов получения 1,2,4-триазинов, содержащих фрагменты природных соединений и фармакофорные группы.

Удобными исходными соединениями для конструирования триазинового цикла, являются арилгидразоноамидины **1**, содержащие в своей структуре линейный или циклический амидиновый фрагмент. Одним из активных электрофильных агентов, широко используемым для гетероциклизаций, который позволяет ввести в молекулы синтезируемых соединений одноуглеродный фрагмент, является этилхлорформиат.

Мы провели исследование реакции амидиногидразонов **1** с этилхлорформиатом в различных условиях, что позволило нам получить серию новых бициклических пиримидо-1,2,4-триазинов **2** и моноциклических 1,2,4-триазинов **3**.